

ЕНЕРГІЯ ОДНОГО ТА ДВОХ ЕЛЕКТРОНІВ У ДВОХ СФЕРИЧНИХ НАНОКРИСТАЛАХ СИСТЕМИ β -HgS/CdS

В. І. Бойчук, В. Б. Гольський

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
кафедра теоретичної фізики, вул. Івана Франка, 24, Дрогобич, 82100, Україна*

(Отримано 20 травня 2003 р.; в остаточному вигляді — 11 червня 2004 р.)

Подано результати дослідження енергетичного спектра електрона основного та збуджених станів двох зв'язаних нанокристалів сферичної форми, системи β -HgS/CdS, для різних відстаней між ними. Визначено залежність величини розщеплення енергетичних рівнів від радіуса нанокристала. Вивчено генезис енергетичного спектра двох нанокристалів різних радіусів від відстані між межами поділу. Також розглянуто енергетичний спектр двох електронів у цій структурі за допомогою двох методів: лінійної комбінації орбіталей квантових ям та методу Гайтлера–Лондона.

Ключові слова: нанокристал, квантові точки, енергетичний рівень.

PACS number(s): 79.60.Gv

I. ВСТУП

Напівпровідникові гетероструктури нанорозмірів на сьогодні є одним із центральних об'єктів дослідження фізики твердого тіла. Структури з попарно зв'язаними квантовими точками (КТ) широко вивчаються експериментально [1–3], зокрема у зв'язку з передбаченою раніше надплинністю в таких системах [4], квазіджозефсонівськими явищами [4, 5], незвичайними явищами в магнетних полях. Зокрема в [6] помічено індукований магнетним полем зсув непрямого екситона в бік низьких енергій і виникнення періодичних у часі флуктуацій інтенсивності ліній непрямого екситона. Виникає можливість керувати тунелюванням носіїв у структурі з двома КТ. У статті [2] показано, що, залежно від напруженості магнетного поля, енергетичні рівні зсуваються в одній з КТ стосовно іншої КТ, що дає змогу електронам резонансно тунелювати між квантовими точками.

Структури з тунельно-зв'язаними КТ важливі як можлива елементарна база для наноелектроніки, для створення на їхній основі напівпровідникових лазерів, квантових перемикачів. Крім того, вони виступають як модельні об'єкти для фундаментальних досліджень — штучні гігантські атоми та молекули з контрольованими параметрами, такими, як вид і жорсткість утримуючого потенціалу, кількість частинок, характерні розміри ділянки їх локалізації [7–9].

Наша стаття присвячена дослідженню енергетичного спектра двох КТ сферичної форми з одним та двома електронами. Для системи КТ β -HgS, помічених у матрицю CdS, одержано залежності енергій електронів від радіуса однієї з КТ, а також відстані між поверхнями розділу КТ.

II. СИСТЕМА ДВОХ КТ З ОДНИМ ЕЛЕКТРОНОМ

Розглядаємо систему двох близько розміщених квантових точок сферичної форми, центри яких пере-

бувають на відстані l від початку координат (рис. 1). Гамільтоніян зарядженої квазічастинки (електрона) у наближенні ефективної маси має вигляд:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \frac{1}{m} \nabla + U(r), \quad (1)$$

$$U = \begin{cases} 0, & |\mathbf{r} - \mathbf{l}| < R_1 \\ 0, & |\mathbf{r} + \mathbf{l}| < R_2 \\ U_0, & |\mathbf{r} - \mathbf{l}| \geq R_1, \quad |\mathbf{r} + \mathbf{l}| \geq R_2 \end{cases} \quad (2)$$

m — ефективна маса електрона для відповідної ділянки, R_1, R_2 — радіуси нанокристалів.

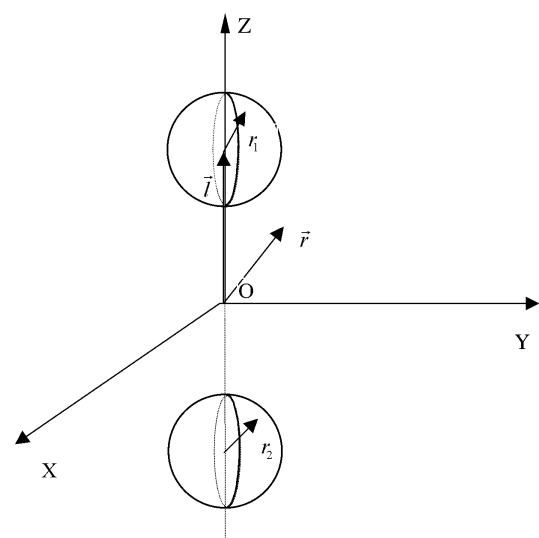


Рис. 1. Модель досліджуваної гетеросистеми.

Рівняння Шредингера з цим гамільтоніаном точно розв'язати не можна. У статті використано наближен-

ня лінійної комбінації орбіталей квантових ям (КЯ). Розгляньмо КЯ таких розмірів, що в них є два енергетичні рівні. Для квантових точок β -HgS, що поміщені в матрицю CdS, розміри КТ повинні бути в межах від 9 Å до 42 Å.

Хвильова функція квазічастинки в наближенні ЛКОКЯ є такою:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = C_1 \Psi_{1s}(r, \theta) + C_2 \Psi_{2s}(r, \theta) + C_3 \Psi_{1p}(r, \theta, \varphi) + C_4 \Psi_{2p}(r, \theta, \varphi), \quad (3)$$

де $\Psi_{is}(r, \theta)$, $\Psi_{ip}(r, \theta, \varphi)$ — хвильова функція основного (s) та першого збудженого станів (p) i -ої ізольованої КЯ,

$$\Psi_{1s}(r, \theta) = \begin{cases} A_{1s} \frac{\sin kr_1}{r_1} & \text{для } |\mathbf{r} - \mathbf{l}| \leq R_1, \\ B_{1s} \frac{\exp(-\chi r_1)}{r_1} & \text{для } |\mathbf{r} - \mathbf{l}| > R_1, \end{cases}$$

$$\Psi_{2s}(r, \theta) = \begin{cases} A_{2s} \frac{\sin kr_2}{r_2} & \text{для } |\mathbf{r} + \mathbf{l}| \leq R_2, \\ B_{2s} \frac{\exp(-\chi r_2)}{r_2} & \text{для } |\mathbf{r} + \mathbf{l}| > R_2, \end{cases}$$

$$\Psi_{1p}(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} A_{1p} \left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta_1 + i \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta_1 \cdot \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \frac{\sin kr_1 - kr_1 \cdot \cos kr_1}{k^2 r_1^2} \right) & \text{для } |\mathbf{r} - \mathbf{l}| \leq R_1, \\ B_{1p} \left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta_1 + i \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta_1 \cdot \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \left(\frac{\exp(-\chi r_1)}{\chi r_1} + \frac{\exp(-\chi r_1)}{\chi^2 r_1^2} \right) \right) & \text{для } |\mathbf{r} - \mathbf{l}| > R_1, \end{cases}$$

$$\Psi_{2p}(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} A_{2p} \left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta_2 + i \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta_2 \cdot \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \frac{\sin kr_2 - kr_2 \cdot \cos kr_2}{k^2 r_2^2} \right) & \text{для } |\mathbf{r} + \mathbf{l}| \leq R_2, \\ B_{2p} \left(\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta_2 + i \cdot \sin \varphi \cdot \sin \theta_2 \cdot \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \left(\frac{\exp(-\chi r_2)}{\chi r_2} + \frac{\exp(-\chi r_2)}{\chi^2 r_2^2} \right) \right) & \text{для } |\mathbf{r} + \mathbf{l}| > R_2, \end{cases}$$

$$r_1 = |\mathbf{r} - \mathbf{l}|, \quad r_2 = |\mathbf{r} + \mathbf{l}|, \quad \theta_1 = \frac{r \cdot \sin(\theta)}{|\mathbf{r} - \mathbf{l}|}, \quad \theta_2 = \frac{r \cdot \sin(\theta)}{|\mathbf{r} + \mathbf{l}|}, \quad l > R_1, l > R_2,$$

$$k = \sqrt{\frac{2m_1}{\hbar^2} (U_0 - E)}, \quad \chi = \sqrt{\frac{2m_2}{\hbar^2} E},$$

m_1, m_2 — ефективні маси електрона нанокристала та матриці відповідно.

Підстановка (3) в стаціонарне рівняння Шредингера з гамільтонієм (1) дає змогу одержати таку систему лінійних однорідних рівнянь:

$$\begin{cases} (H_{11} - E) C_1 + (H_{12} - E S_{12}) C_2 + (H_{13} - E S_{13}) C_3 + (H_{14} - E S_{14}) C_4 = 0, \\ (H_{21} - E S_{21}) C_1 + (H_{22} - E) C_2 + (H_{23} - E S_{23}) C_3 + (H_{24} - E S_{24}) C_4 = 0, \\ (H_{31} - E S_{31}) C_1 + (H_{32} - E S_{32}) C_2 + (H_{33} - E) C_3 + (H_{34} - E S_{34}) C_4 = 0, \\ (H_{41} - E S_{41}) C_1 + (H_{42} - E S_{42}) C_2 + (H_{43} - E S_{43}) C_3 + (H_{44} - E) C_4 = 0, \end{cases} \quad (4)$$

де $H_{ij} = \int \Psi_i^*(\mathbf{r}, \theta) \hat{H} \Psi_j(\mathbf{r}, \theta) d\tau$, $S_{ij} = \int \Psi_i(\mathbf{r}, \theta) \Psi_j(\mathbf{r}, \theta) d\tau$ $i, j = 1, 2, 3, 4$ (1,2 — коефіцієнти, що відповідають хвильовій функції основного стану (s) 1 та 2 ізольованої КЯ; 3,4 — хвильовій функції першого збудженого стану (p) 1 та 2 ізольованої КЯ).

Система рівнянь має розв'язок тоді, коли її детермінант дорівнює нулеві. З одержаного рівняння для E визначено енергію розгляданої гетероструктури.

Конкретні обчислення проведено для системи β -HgS / CdS, у якій нанокристал HgS, що є в матриці CdS, моделюється сферичною скінченною квантовою ямою.

Для квантових точок, розміри яких менші за 8 Å, в цій моделі зв'язаних енергетичних станів не виникає. Коли радіуси квантових ям лежать у межах від 9 Å до 24 Å, кожна незалежна КЯ характеризується одним зв'язаним станом, а для $25 \text{ Å} \leq R \leq 42 \text{ Å}$ —

двома зв'язаними станами.

Як видно з рис. 2, для двох однакових за розміром КТ зменшення відстані між поверхнями розділу:

$$d = 2l - R_1 - R_2$$

веде до збільшення розщеплення ΔE енергетичних рівнів системи. Причому рівень $1s$ розщеплюється менше, ніж рівень $1p$. Зокрема для $d = 5.8 \text{ \AA}$ (стала ґратки CdS) та $R_1 = R_2 = R = 30 \text{ \AA}$, $\Delta E_s = 48 \text{ meV}$, а $\Delta E_p = 183 \text{ meV}$.

У результаті розщеплення основного та збудженого станів при зменшенні d виникає, замість двох, спочатку три, а при $d \leq 11.6 \text{ \AA}$ ($R_1 = R_2 = R = 27 \text{ \AA}$) чотири енергетичні рівні. Енергія першого і третього рівнів зменшується зі зменшенням відстані між поверхнями розділу квантових точок, а другого та четвертого — зростає. Причому зменшення d веде до зменшення (збільшення) енергій між третім (четвертим) та двома нижніми рівнями.

Величина розщеплення залежить не лише від відстані d для двох КТ, але й від розмірів нанокристалів. Чим менший радіус нанокристалів, тим більша величина ΔE . Зокрема, якщо $d = 5.8 \text{ \AA}$, то для КТ з $R_1 = R_2 = R = 35 \text{ \AA}$ одержано, що $\Delta E_s = 38.7 \text{ meV}$, а $\Delta E_p = 133.1 \text{ meV}$ (рис. 3). Отже, зменшення радіуса нанокристалів супроводжується збільшенням взаємного впливу на зміну енергетичного спектра системи КТ.

Рівняння (4) можна використати і для різних за розмірами нанокристалів. Обчислення показали, що ефективна взаємодія менша між нанокристаломі різних радіусів. У цьому випадку система характеризується чотирма рівнями, які дуже слабо відхиляються від відповідних рівнів ізольованих КТ.

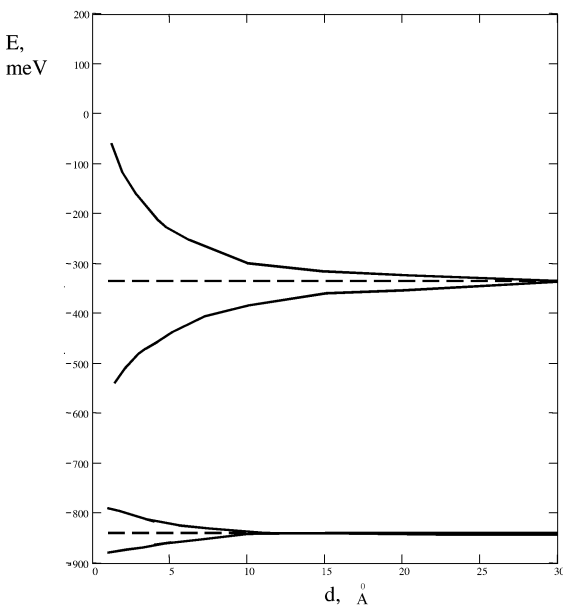


Рис. 2. Залежність розщеплення s - і p - енергетичних рівнів електрона двох однакових квантових ям ($R = 30 \text{ \AA}$) від відстані між ними.

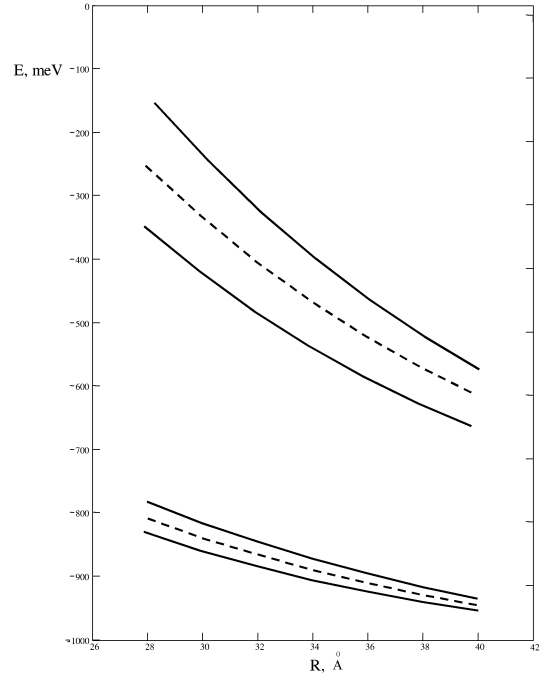


Рис. 3. Залежність енергетичних рівнів електрона (суцільні лінії) двох взаємодіючих однакових нанокристалів від їхнього радіуса для $d = 5.8 \text{ \AA}$. (Штрихова лінія відповідає енергії однієї квантової ями).

ІІІ. ДВІ КВАНТОВІ ЯМИ З ДВОМА ЕЛЕКТРОНАМИ

Розглядаємо систему двох близько розміщених квантових точок сферичної форми, у якій є два електрони (рис. 4). Гамільтоніан цієї системи в наближенні ефективної маси має вигляд:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2} \nabla_1^2 \frac{1}{m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2} \nabla_2^2 \frac{1}{m} \nabla_2^2 \\ & + \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + U(r), \end{aligned} \quad (5)$$

де $U(r)$ задається формулою (2), m — ефективна маса електрона для відповідної ділянки, R_1, R_2 — радіуси нанокристалів.

Рівняння Шредингера з гамільтоніаном (5) розв'язано в наближенні Гайтлера–Лондона (6) та лінійної комбінації орбіталей квантових ям (7). Розглянуто КТ таких розмірів, що в них є один енергетичний рівень [10]:

$$\Psi_{H-L} = \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) + \Psi_2(r_1) \Psi_1(r_2), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{LCOQW} = & \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) + \Psi_2(r_1) \Psi_1(r_2) \\ & + \Psi_1(r_1) \Psi_1(r_2) + \Psi_2(r_1) \Psi_2(r_2), \end{aligned} \quad (7)$$

де $\Psi_i(\mathbf{r})$ — хвильова функція i -ої квантової ями.

Підстановка відповідної хвильової функції в стаціонарне рівняння Шредингера з гамільтоніаном (5) дає змогу одержати рівняння для енергії.

Знайдено енергію основного стану цієї системи. З рис. 4 видно, що збільшення відстані між КТ супроводжується зменшенням відхилення енергетичного від $2E_0$ (E_0 — енергія основного стану в одній ізольованій КТ). Також слід відзначити певну різницю між енергіями основного стану в наближеннях Гайтлера–Лондона і ЛКОКЯ.

З рис. 4. видно, що в наближенні Гайтлера–Лондона одержуємо меншу енергію основного стану. Коли відстань між межами поділу нанокристалів становить одну сталу ґратки, а $R_1 = R_2 = R = 20 \text{ \AA}$, то різниця для енергій, що відповідає хвильовим функціям (6) і (7), дорівнює: $\Delta E = 82 \text{ meV}$, що становить 6.7%. Збільшення відстані веде до повільного зменшення енергії основного стану й одночасного зростання різниці між енергіями системи в розглянутих наближеннях. Зокрема, для $d = 30 \text{ \AA}$ (п'ять сталих ґратки) $\Delta E = 87 \text{ meV}$.

Отже, в нашій статті обчислено енергії електрона основного та збуджених станів двох зв'язаних нанокристалів системи $\beta\text{-HgS} / \text{CdS}$ для різних відстаней між ними. Визначено залежність величини розщеплення енергетичних рівнів від радіуса нанокристала. Вивчено генезис енергетичного спектра двох нанокристалів різних радіусів від відстані між межами поділу. Також досліджено енергетичний спектр двох

електронів у цій структурі за допомогою двох методів: лінійної комбінації орбіталей квантових ям та методу Гайтлера–Лондона.

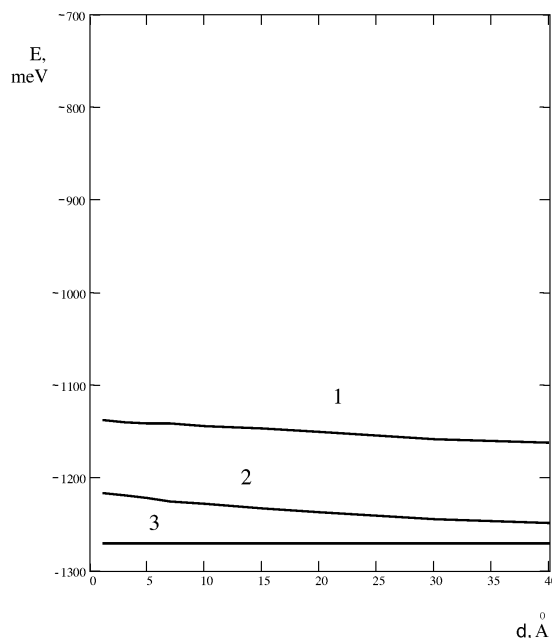


Рис. 4. Енергія системи двох електронів двох зв'язаних квантових ям. (1 — метод ЛКОКЯ, 2 — метод Гайтлера–Лондона, 3 — енергія $2E_0$).

- [1] А. В. Ларионов, В. Б. Тимофеев, М. Bayer, A. Forchel, *Нанофотоника* (Новгород, 2001).
- [2] K. Ono, D. G. Austing, Y. Tokura, S. Tarucha, *Physica B: Condensed Matter* **314**, 450 (2002).
- [3] М. В. Максимов, Ю. М. Шерняков *и др.* *Физ. техн. полупр.* **31**, 6, 670 (1997).
- [4] T. Demel, D. Heitmann, P. Grambow, K. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 7, 788 (1990).
- [5] J. Dempsey, N. F. Jonson, L. Brey, B. I. Holperin, *Phys. Rev. B* **18**, 11708 (1990).
- [6] В. В. Криволапчук, Д. А. Мазуренко, Е. С. Москаленко, Н. К. Полетаев, А. Л. Жмодиков, Т. С. Ченг, С. Т. Фоксон, *Физ. тверд. тела* **40**, 5, 803 (1998).
- [7] Н. Е. Капуткина, Ю. Е. Лозовик, *Физ. тверд. тела* **40**, 11, 2127 (1998).
- [8] Н. Е. Капуткина, Ю. Е. Лозовик, *Физ. тверд. тела* **40**, 11, 2134 (1998).
- [9] Ю. Е. Лозовик, О. Л. Берман, А. А. Панфилов, *Физ. тверд. тела* **40**, 12, 2226 (1998).
- [10] В. І. Бойчук, В. Б. Гольський, *Укр. физ. журн.* **3**, 342 (2001).

THE ENERGY OF ONE AND TWO ELECTRONS IN TWO SPHERICAL NANO CRYSTALS OF THE $\beta\text{-HgS}/\text{CdS}$ SYSTEM

V. I. Boichuk, V. B. Holskyi
Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University
Department for theoretical physics
 24 Franko St., Drohobych UA-82100, Lviv Region, Ukraine

In the present work the results of research of a power spectrum of an electron of the basic and exited conditions of two connected nanocrystals of the spherical form, as well as $\beta\text{-HgS}/\text{CdS}$ systems for different distances between them are submitted. The dependence of energy levels splithing on radius nano crystal is studied. The genesis of the energy spectrum of two nanocrystals of different radii from the distance between the borders of division is considered too. A energy spectrum of two electrons in the given structure is also investigated with the help of two methods: that of linear combination of quantum wells orbits and the Heitler–London method.